

СЕКЦИЯ 5. СОВРЕМЕННЫЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ И КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ В МЕТАЛЛОВЕДЕНИИ

УДК 538.913

А. И. Чередниченко*, П. В. Захаров, А. М. Еремин, И. С. Луценко

Алтайский государственный гуманитарно-педагогический университет имени
В. М. Шукшина, г. Бийск, Россия

**anton.chered@mail.ru*

ДИСКРЕТНЫЕ БРИЗЕРЫ В МОНОАТОМНЫХ ГЦК-КРИСТАЛЛАХ Au, Pd

Методом молекулярной динамики в моноатомных ГЦК-кристаллах Au и Pd был получен дискретный бризер с жестким типом нелинейности. Изучены характеристики дискретного бризера, приведена зависимость частоты от амплитуды. Проведено исследование влияния начальных условий на характеристики дискретного бризера.

Ключевые слова: дискретный бризер, нелинейная динамика, метод молекулярной динамики, локализованная мода.

A. I. Cherednichenko, P. V. Zaharov, A. M. Eremin, I. S. Lutsenko
DISCRETE BREATHERS IN MONOATOMIC FCC CRYSTALS
AU, PD

By method of molecular dynamics in the monoatomic FCC crystals Au and Pd was obtained discrete breathers with a hard type of nonlinearity. The characteristics of discrete breathers, the dependence of frequency of the amplitude were received. The influence of the initial conditions on the characteristics of discrete breathers.

Keywords: discrete breathers, nonlinear dynamics, molecular dynamics method, localized mode.

Дискретный бризер (ДБ) представляет собой нелинейные локализованные незатухающие колебания большой амплитуды атомов идеального кристалла [1]. В большинстве моделей присутствуют квазибризеры [2] в силу отсутствия возможности задания идеальных начальных условий для всех атомов, участвующих в колебаниях.

В данной работе рассматриваются ГЦК-металлы (Au, Pd) и возможность существования в них квазибризеров.

По характеру зависимости частоты от амплитуды ДБ можно разделить на два типа: мягкие и жесткие. У дискретных бризеров мягкого

типа частота уменьшается с увеличением амплитуды, и они могут существовать только в кристаллах, имеющих щель в фононном спектре. Их называют щелевыми, поскольку их частота лежит в щели фононного спектра. Жесткий тип нелинейности подразумевает зависимость частоты, от амплитуды, при которой увеличение амплитуды приводит к увеличению частоты, при этом дискретные бризеры этого типа могут иметь частоты, как в щели, так и выше фононного спектра.

Для моделирования ДБ в металлах Au и Pd мы использовали пакет молекулярной динамики LAMMPS [3]. Исследуемые модели представляли собой объемные ГЦК-кристаллы, содержащие от 6000 до 250000 атомов. Для моделирования межатомного взаимодействия использовались еam-потенциалы, входящие в набор программного пакета LAMMPS.

Начальные условия для возбуждения неподвижного дискретного бризера с жестким типом нелинейности задавались посредством анзаца, предложенного в работе [4], следующим образом:

$$x_n^0 = T_n + S_n, \quad \dot{x}_n^0 = 0, \quad y_n^0 = 0, \quad \dot{y}_n^0 = 0, \quad (1)$$

где x_n^0 , y_n^0 и \dot{x}_n^0 , \dot{y}_n^0 – компоненты векторов начальных перемещений и начальных скоростей n – го атома плотноупакованного ряда кристалла. Все остальные атомы кристалла имели нулевые начальные перемещения и начальные скорости. Функции T_n и S_n описывают амплитуды колебания и смещения центров колебания атомов соответственно. То есть $T_n = (x_{n,\max} - x_{n,\min})/2$, $S_n = (x_{n,\max} + x_{n,\min})/2$, где $x_{n,\max}$ и $x_{n,\min}$ – это максимальное и минимальное значение функции $x_n(t)$, описывающей движение n -го атома. Данные функции имели вид:

$$T_n = \frac{(-1)^n A}{\cosh[\beta(n-x_0)]}, \quad S_n = \frac{-B(n-x_0)}{\cosh[\gamma(n-x_0)]}, \quad (2)$$

где параметр A определяет амплитуду ДБ, параметр B определяет амплитуду смещений центров колебаний атомов, параметры $\beta = \gamma$ задают степень пространственной локализации ДБ, а x_0 – его начальное положение. При $x_0 = 0$ имеем ДБ, цетрированный на атоме, а при $x_0 = 1/2$ – посередине между двумя соседними атомами [4].

Подбор параметров анзаца проводился методом проб и ошибок. После того как устойчивый ДБ был найден, производилось систематическое варьирование того или иного параметра анзаца и отслеживалось поведение дискретного бризера.

Выбор металлов для исследования обусловлен тем, что все они применяются во многих технологических процессах. Многие процессы передачи и локализации энергии в кристаллах при этом остаются малоизученными.

В данной работе проводилось исследование зависимости времени жизни ДБ от параметров анзаца (1).

В ходе проведенных экспериментов получена зависимость времени жизни ДБ в Au и Pd от начальной амплитуды, также была исследована такая важная характеристика, как зависимость частоты колебаний атомов ДБ от амплитуды (рис. 1, рис. 2).

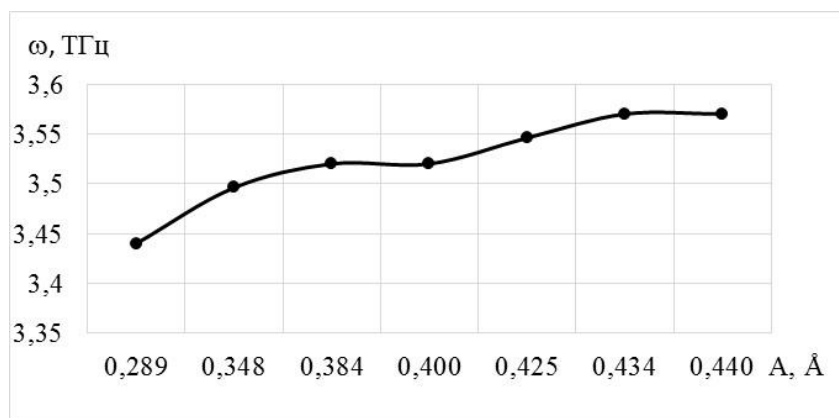


Рис. 1. Зависимость частоты дискретного бризера от амплитуды колебаний атомов (Au)

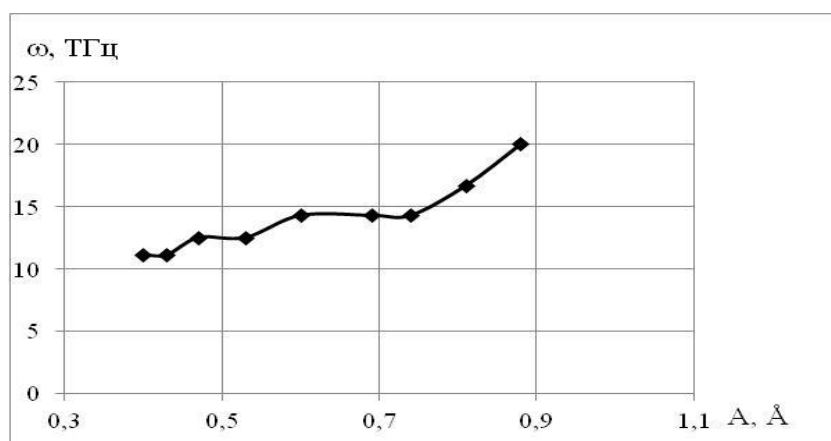


Рис. 2. Зависимость частоты дискретного бризера от амплитуды колебаний атомов (Pd)

В таблице приведены основные параметры рассматриваемых модельных ГЦК-металлов, также показано максимальное время жизни ДБ, которого удалось достичь в компьютерных экспериментах.

Полученные зависимости говорят о достаточной устойчивости ДБ к вариации начальных условий его возбуждения, менее всего на время жизни ДБ оказывает влияние изменение параметра γ .

Таким образом, методом молекулярной динамики в моноатомных ГЦК-кристаллах Au и Pd был получен дискретный бризер с жестким типом нелинейности методом, предложенным в работах [4]. Изучены свойства дискретного бризера, такие как его время жизни, зависимость частоты от амплитуды, пространственная локализация. Проведено исследование влияния начальных условий на характеристики дискретного бризера, что

может быть полезно при возбуждении таких объектов в реальных кристаллах с ГЦК-структурой.

Параметры ГЦК-металлов и максимальное время жизни ДБ

Параметр	Pd	Au
a_0 (Å)	3,89	4,078
E_0 (эВ/атом)	-3,91	-3,93
c_{11} (1011 Па)	2,35	1,97
c_{12} (1011 Па)	1,8	1,65
c_{44} (1011 Па)	0,82	0,45
Модуль упругости (ГПа)	188	178
Модуль Юнга (ГПа)	127	78
Модуль сдвига (ГПа)	46	27,5
Плотность г/см ³	12,02	19,32
Время жизни ДБ	74	154
Параметр уравнения (2) A	0,5	0,65
Параметр уравнения (2) β	0,05	0,25
Параметр уравнения (2) B	0,3	0,45
Параметр уравнения (2) γ	0,46	0,5

ЛИТЕРАТУРА

1. Flach S., Gorbach A.V. Discrete breathers advancer in theory and application // Phys. Rep. 2008. 467. P. 1–116.
2. Chechin G.M., Dzhelauhova G. S., Mehonoshina E. A. Quasibreathers as a generalization of discrete breathers // Phys. Rev. E. 2006. V. 74. P. 036608.
3. LAMMPS Molecular Dynamics Simulator : официальный сайт. URL: <http://lammps.sandia.gov/> (дата обращения: 14.10.2016).
4. Кистанов А. А., Дмитриев С. В., Семенов А. С. Взаимодействие движущихся дискретных бризеров с вакансией в двумерном моноатомном кристалле // Письма в ЖТФ. 2014. Т. 40, № 15. С. 58–65.